

T S15/7/ALL FROM 347

15/7/2 (Item 1 from file: 347)
DIALOG(R) File 347:JAPIO
(c) 2003 JPO & JAPIO. All rts. reserv.

J7723737 **Image available**
FUEL CELL SIMULATOR, FUEL CELL SIMULATION METHOD, FUEL CELL SIMULATION
PROGRAM, AND RECORDING MEDIUM WITH THE PROGRAM RECORDED THEREIN

PUB. NO.: 2003-217638 [JP 2003217638 A]
PUBLISHED: July 31, 2003 (20030731)
INVENTOR(s): YOKOO MASAYUKI
WATABE KIMITAKA
TAKEUCHI AKIRA
YAMASHITA NOBUHIKO
ENDO NAOE
APPLICANT(s): NIPPON TELEGR & TELEPH CORP (NTT)
APPL. NO.: 2002-214032 [JP 2002214032]
FILED: July 23, 2002 (20020723)
PRIORITY: 2001-347344 [JP 2001347344], JP (Japan), November 13, 2001
(20011113)

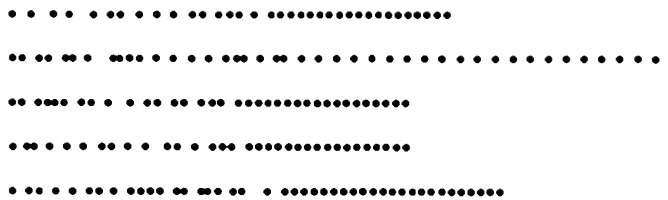
ABSTRACT

PROBLEM TO BE SOLVED: To provide a fuel cell simulator capable of
simulating the relation between the operation voltage and the power
generation efficiency even to a fuel cell system of a several kW class, a
fuel cell simulation method, a fuel cell simulation program, and a
recording medium with the program recorded therein.

SOLUTION: In the fuel cell system having an external reformer 4, an
internal reformer 8, a solid oxide fuel cell 9, and a combustor 10, the
total calorie Hkeep per unit time required for maintaining the temperature
of the system and the total heat of chemical reaction Hreac per unit time
in the system are calculated, and if $H_{\text{keep}} > H_{\text{reac}}$,
 $\eta(V) = w / (nE + H_{\text{keep}} - H_{\text{reac}})$, or if $H_{\text{keep}} \leq H_{\text{reac}}$, $\eta(V) = w / (nE)$, and the
fuel cell simulator to calculate the power generation efficiency $\eta(V)$
at the operational voltage V is constituted, where w is the electric
output, n is the mol number of the fuel charged in unit time, and E is the
energy emitted from the fuel of 1 mol.

COPYRIGHT: (C) 2003, JPO
?

● ● ● ● ● ● ● ● ● ●



-

.....

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開2003-217638

(P2003-217638A)

(43) 公開日 平成15年7月31日 (2003.7.31)

(51) Int.Cl.	識別記号	F I	テ-マ-ト* (参考)
H 0 1 M 8/04		H 0 1 M 8/04	Z 5 B 0 5 6
G 0 6 F 17/10		G 0 6 F 17/10	Z 5 H 0 2 6
	1 1 0	19/00	1 1 0 5 H 0 2 7
// H 0 1 M 8/12		H 0 1 M 8/12	

審査請求 未請求 請求項の数 8 O L (全 14 頁)

(21) 出願番号 特願2002-214032(P2002-214032)

(22) 出願日 平成14年7月23日 (2002.7.23)

(31) 優先権主張番号 特願2001-347344(P2001-347344)

(32) 優先日 平成13年11月13日 (2001.11.13)

(33) 優先権主張国 日本 (J P)

(71) 出願人 000004226

日本電信電話株式会社

東京都千代田区大手町二丁目3番1号

(72) 発明者 横尾 雅之

東京都千代田区大手町二丁目3番1号 日

本電信電話株式会社内

(72) 発明者 渡部 仁貴

東京都千代田区大手町二丁目3番1号 日

本電信電話株式会社内

(74) 代理人 100075753

弁理士 和泉 良彦 (外1名)

最終頁に続く

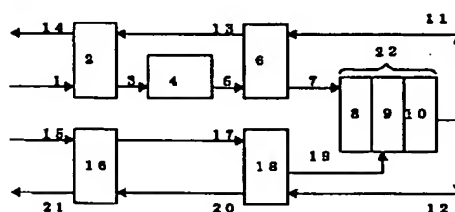
(54) 【発明の名称】 燃料電池シミュレータ、燃料電池のシミュレーション方法、燃料電池のシミュレーションプログラムおよびそのプログラムを記録した記録媒体

(57) 【要約】

【課題】数kW級の燃料電池システムに対しても、運転電圧と発電効率との関係をシミュレートできる燃料電池シミュレータ、燃料電池のシミュレーション方法、燃料電池のシミュレーションプログラムおよびそのプログラムを記録した記録媒体を提供すること。

【解決手段】外部改質器4、内部改質器8、固体酸化物形燃料電池9、燃焼器10を有する燃料電池システムの、システムの温度維持に必要な単位時間あたりの総熱量 H_{keep} と、システムでの単位時間あたりの化学反応熱の総和 H_{reac} とを算出し、 $H_{keep} > H_{reac}$ ならば $\eta(V) = w / (nE + H_{keep} - H_{reac})$ 、 $H_{keep} \leq H_{reac}$ ならば $\eta(V) = w / (nE)$ として、運転電圧Vにおける発電効率 $\eta(V)$ を算出する燃料電池シミュレータを構成する。wは電気出力、nは単位時間あたり投入される燃料のモル数、Eは燃料1モルが放出するエネルギーである。

図1



- 1→炭化水素系ガス
- 2→一般改質器
- 3→一般改質器2から抽出する混合ガス
- 4→外部改質器
- 5→外部改質器4から抽出する混合ガス
- 6→一般改質器
- 7→一般改質器6から抽出する混合ガス
- 8→内部改質器
- 9→固体酸化物形燃料電池
- 10→燃焼器
- 11、12→一般改質器10の排ガス
- 13、14→排ガス
- 15→空気
- 16→一般改質器
- 17→一般改質器
- 18→一般改質器
- 19→空気
- 20、21→排ガス
- 22→セルスタック

【特許請求の範囲】

【請求項1】燃料電池システムの特性をシミュレートする燃料電池シミュレータに於いて、環境温度に対して前記燃料電池システムの各構成要素を運転温度に維持する為に必要な単位時間あたりの熱量の総和 $H_{k.e.e.p}$ と、前記各構成要素での単位時間あたりの化学反応熱の

$$\eta(V) = w/(nE + H_{k.e.e.p} - H_{r.e.a.c}) \quad (1)$$

$$\eta(V) = w/(nE) \quad (2)$$

但し、 w は前記燃料電池システムの電気出力であり、 n は前記燃料電池システムに単位時間あたり投入する燃料のモル数であり、 E は前記燃料1モルの燃焼によって放出されるエネルギーである。

【請求項2】請求項1に記載の燃料電池シミュレータに於いて、下記式(3)に基づいて前記発電効率 $\eta(V)$ を最大にする運転電圧 V_{opt} を算出する演算手段を有することを特徴とする燃料電池シミュレータ。

【数1】

【数1】

$$\left. \frac{\partial \eta(V)}{\partial V} \right|_{V=V_{opt}} = 0 \quad (3)$$

$$\eta(V) = w/(nE + H_{k.e.e.p} - H_{r.e.a.c}) \quad (1)$$

$$\eta(V) = w/(nE) \quad (2)$$

但し、 w は前記燃料電池システムの電気出力であり、 n は前記燃料電池システムに単位時間あたり投入する燃料のモル数であり、 E は前記燃料1モルの燃焼によって放出されるエネルギーである。

【請求項4】請求項3に記載の燃料電池のシミュレーション方法に於いて、下記式(3)に基づいて前記発電効率 $\eta(V)$ を最大にする運転電圧 V_{opt} を算出することを特徴とする燃料電池のシミュレーション方法。

【数2】

【数2】

$$\left. \frac{\partial \eta(V)}{\partial V} \right|_{V=V_{opt}} = 0 \quad (3)$$

$$\eta(V) = w/(nE + H_{k.e.e.p} - H_{r.e.a.c}) \quad (1)$$

$$\eta(V) = w/(nE) \quad (2)$$

但し、 w は前記燃料電池システムの電気出力であり、 n は前記燃料電池システムに単位時間あたり投入する燃料のモル数であり、 E は前記燃料1モルの燃焼によって放出されるエネルギーである。

【請求項6】燃料電池のシミュレーションプログラムであって、コンピュータに、環境温度に対して前記燃料電池システムの各構成要素を運転温度に維持する為に必要な単位時間あたりの熱量の総和 $H_{k.e.e.p}$ と、前記各構成要素での単位時間あたりの化学反応熱の総和 $H_{r.e.a.c}$ とを算出し、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ よりも大きければ下記式(1)を用い、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ を超えなければ下記式(2)を用いて、前記燃料電池システムの運転電圧 V における発電効率 $\eta(V)$ を算出する演算手段を実行させ、下記式(3)に基づいて前記発電効率 $\eta(V)$ を最大にする運転電圧 V_{opt} を算出する演算手段を実行させるための燃料電池のシミュレーションプログラム。

$$\eta(V) = w/(nE + H_{k.e.e.p} - H_{r.e.a.c}) \quad (1)$$

$$\eta(V) = w/(nE) \quad (2)$$

総和 $H_{r.e.a.c}$ とを算出し、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ よりも大きければ下記式(1)を用い、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ を超えなければ下記式(2)を用いて、前記燃料電池システムの運転電圧 V における発電効率 $\eta(V)$ を算出する演算手段を有することを特徴とする燃料電池シミュレータ。

【請求項3】燃料電池システムの特性をシミュレートする燃料電池のシミュレーション方法に於いて、環境温度に対して前記燃料電池システムの各構成要素を運転温度に維持する為に必要な単位時間あたりの熱量の総和 $H_{k.e.e.p}$ と、前記各構成要素での単位時間あたりの化学反応熱の総和 $H_{r.e.a.c}$ とを算出し、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ よりも大きければ下記式(1)を用い、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ を超えなければ下記式(2)を用いて、前記燃料電池システムの運転電圧 V における発電効率 $\eta(V)$ を算出することを特徴とする燃料電池のシミュレーション方法。

【請求項5】燃料電池のシミュレーションプログラムであって、コンピュータに、環境温度に対して前記燃料電池システムの各構成要素を運転温度に維持する為に必要な単位時間あたりの熱量の総和 $H_{k.e.e.p}$ と、前記各構成要素での単位時間あたりの化学反応熱の総和 $H_{r.e.a.c}$ とを算出する演算手段を実行させ、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ よりも大きければ下記式(1)を用い、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ を超えなければ下記式(2)を用いて、前記燃料電池システムの運転電圧 V における発電効率 $\eta(V)$ を算出する演算手段を実行させるための燃料電池のシミュレーションプログラム。

$H_{r.e.a.c}$ とを算出する演算手段を実行させ、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ よりも大きければ下記式(1)を用い、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ を超えなければ下記式(2)を用いて、前記燃料電池システムの運転電圧 V における発電効率 $\eta(V)$ を算出する演算手段を実行させ、下記式(3)に基づいて前記発電効率 $\eta(V)$ を最大にする運転電圧 V_{opt} を算出する演算手段を実行させるための燃料電池のシミュレーションプログラム。

但し、 w は前記燃料電池システムの電気出力であり、 n は前記燃料電池システムに単位時間あたり投入する燃料のモル数であり、 E は前記燃料1モルの燃焼によって放出されるエネルギーである。

【数3】

【数3】

$$\frac{\partial \eta(V)}{\partial V} \bigg|_{V=V_{max}} = 0 \quad (3)$$

【請求項7】請求項5に記載の燃料電池のシミュレーションプログラムを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体。

【請求項8】請求項6に記載の燃料電池のシミュレーションプログラムを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は燃料電池シミュレータ、燃料電池のシミュレーション方法、燃料電池のシミュレーションプログラムおよびそのプログラムを記録した記録媒体に関し、特に、燃料電池の設計・評価に用いる燃料電池シミュレータ、燃料電池のシミュレーション方法、燃料電池のシミュレーションプログラムおよびそのプログラムを記録した記録媒体に関するものである。

【0002】

【従来の技術】図1は、燃料電池システムの一例である固体酸化物形燃料電池(SOFC)システムの構成を示す図である。図において、4はシステムに投入される炭化水素系ガス1の水蒸気改質反応、 $C_m H_{2m+2} + m H_2 O \rightarrow m CO + (2m+1) H_2$ を行う外部改質器であり、8はセルスタック22内で水蒸気改質を行うための触媒が充填された内部改質器であり、9は一酸化炭素の電解質を介した酸化反応、 $CO + O^{2-} \rightarrow CO_2 + 2e^-$ 及び水素の電解質を介した酸化反応、 $H_2 + O^{2-} \rightarrow H_2 O + 2e^-$ を行う固体酸化物形燃料電池であり、10はセルスタック22内で電池反応を行った後の混合ガス(矢印の表示なし)に含まれる水素及び一酸化炭素の燃焼反応、 $CO + 0.5 O_2 \rightarrow CO_2$ 、及び、 $H_2 + 0.5 O_2 \rightarrow H_2 O$ を行う燃焼器であり、6は燃焼器10の排ガスの一部11と外部改質器4から流出する混合ガス5との熱交換を行う熱交換器であり、2は熱交換器6から流出する排ガス13と炭化水素系ガス1との熱交換を行う熱交換器であり、18は固体酸化物形燃料電池9に流入する空気19と燃焼器10の排ガスからその一部11を除いた残りの排ガス12との熱交換を行う熱交換器であり、16は熱交換器18から流出する排ガス20と空気15との熱

交換を行う熱交換器である。

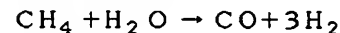
【0003】炭化水素系ガス1は、熱交換器2によって加熱され、水蒸気との混合ガス3となって外部改質器4に流入して改質反応を起こした後、混合ガス5となって熱交換器6を通り、熱交換後の混合ガス7は内部改質器8に流入して改質反応を起こした後、固体酸化物形燃料電池9に流入する。空気15は熱交換器16で外部改質器4の温度まで加熱され、高温の空気17となり、熱交換器18を経由して固体酸化物形燃料電池9に流入する。固体酸化物形燃料電池9に於ける反応後の混合ガスは燃焼器10に流入して燃焼反応を起こした後、熱交換器6及び2あるいは熱交換器18及び16を経由して、排ガス14あるいは21として排出される。

【0004】従来、図1に示したような燃料電池システムは、システム構成要素を運転温度に維持する為の熱を無視した特性予測がなされてきた。このような例は、例えば、永田進、門馬昭彦、嘉藤徹、春日康弘、「内部改質型SOFCをトッピングした複合発電システムの特性予測」、燃料電池シンポジウム講演予稿集、1998年、189-194頁に報告されている。この場合、システムに投入するエネルギーは燃料の燃焼によって放出されるエネルギーだけであるから、運転電圧 V における発電効率 $\eta(V)$ は

$$\eta(V) = w / (nE)$$

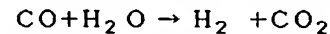
と表現できる。但し、 w は燃料電池システムのAC出力であり、 n はシステムに単位時間あたり投入する燃料のモル数であり、 E は燃料1モルの燃焼によって放出されるエネルギーである。

【0005】例えば、燃料をS/C比が2.00となるように水を添加したメタン(CH_4)とする。燃料は、ほぼ100%外部改質器4及び内部改質器8で水蒸気改質されて水素(H_2)と一酸化炭素(CO)となる。その場合の反応は、



で表される。

【0006】 CO は、さらに、水性シフト反応、



するが、この反応で1モルの CO から1モルの H_2 が生成し、水性シフト反応の前と後とで、 H_2 と CO のモル数の総和は変わらないので、固体酸化物形燃料電池9には、単位時間あたり合計で4nモルの H_2 と CO が供給される。1モルの CO の電解質を介した酸化反応及び1モルの H_2 の電解質を介した酸化反応からは、共に2モルの電子が取り出せるので、ファラデー定数を F 、固体酸化物形燃料電池9での H_2 と CO の電池反応させる割合を共に r とすれば、固体酸化物形燃料電池9から取り出せる電流 I は、

$$I = 8nrF$$

で表される。時間の単位を秒、 F の単位をクーロンとすれば、 I の単位はアンペアとなる。これより、固体酸化

物形燃料電池9の運転電圧をVとすれば、固体酸化物形燃料電池9の直流出力 w_d は、

$$w_d = IV = 8nrFV$$

で表される。I、Vの単位をそれぞれアンペア、ボルトとすれば、 w_d の単位はワットとなる。

【0007】直流電力を交流電力に変換する際のロス

$$\eta(V) = 8(1-\lambda_{AD})(1-\lambda_{aux})rFV/E \quad (4)$$

となる。この $\eta(V)$ は、運転電圧Vと、 H_2 及びCOが電池反応する割合のみで決定されているため、電気出力の大きさに影響を受けない。

【0008】

【発明が解決しようとする課題】しかし、実際の固体酸化物形燃料電池システムの効率は、数kW級のシステムの方が数100kW級のシステムより低くなり、電気出力の大きさの影響も存在する。すなわち、従来のシミュレーション技術では数kW級の固体酸化物形燃料電池システムの評価を正しく行えていないということになる。

【0009】従来のシミュレーション技術では数100kW級のシステムの評価しか正確には行えない理由を以下に説明する。

【0010】数100kW級の固体酸化物形燃料電池システムにおいては、通常の運転条件下（運転電圧0.6～0.7ボルト程度、電池反応させる燃料の割合80％程度）であれば、化学反応熱がシステム構成要素を運転温度に維持する為の熱を上回るので、外部から熱を供給することなく運転温度を維持することができる。従って、数100kW級の固体酸化物形燃料電池システムの発電効率は、システム構成要素を運転温度に維持する為の熱を無視した従来のシミュレーション技術でも正しく評価できる。

【0011】これに対し、数kW級の固体酸化物形燃料電池システムにおいては、通常の運転条件下であれば、システム構成要素を運転温度に維持する為の熱が化学反応熱を上回るので、電池反応させる燃料の割合を減少させ、酸化反応させる割合を増やしたり、運転電圧を低下させたりするなどの特殊な運転条件で運転するか、あるいは、外部から熱を供給しなくてはならない。こういった数kW級の固体酸化物形燃料電池システムの発電効率は、システム構成要素を運転温度に維持する為の熱を無視した従来のシミュレーション技術では正しく評価できない。

【0012】また、上記式(4)が成立している場合、電池反応させる燃料の割合が一定であれば、燃料電池システムの発電効率 $\eta(V)$ と運転電圧Vの関係は比例関係となる。すなわち発電効率はVが高ければ高いほど発電効率が高いということになる。化学反応熱がシステム構成要素を運転温度に維持する為の熱を上回っている限り、この評価は正しい。

【0013】しかし、運転電圧を上昇させれば、出力密度が小さくなり固体酸化物形燃料電池の体積を大きくす

の、直流電力に対する割合を λ_{AD} 、ガスを流動させるのに必要なエネルギーの、交流に変換された電力に対する割合を λ_{aux} とすると、燃料電池の交流出力 w は、

$$w = 8(1-\lambda_{AD})(1-\lambda_{aux})nrFV$$

で表される。従って、燃料電池の発電効率 $\eta(V)$ は、

必要があるので、運転電圧を開回路電圧（以降、OCVで表す）に近づけていけば、化学反応熱はシステム構成要素を運転温度に維持する為の熱を下回ることになる。従って、ある電圧以上では、電池反応させる燃料の割合を減少させたり、運転電圧を低下させたりするなどの特殊な運転条件で運転するか、あるいは、外部から熱を供給しなくてはならない。従って、運転電圧は高ければ高いほど発電効率も高いということではなく、ある運転電圧で最大の発電効率となる。このような、運転電圧を V_{opt} とする。

【0014】例えば、ビルなどに導入する数100kW級のシステムでは、化学反応熱がシステム構成要素を運転温度に維持する為の熱を十分に上回り、燃料電池の発電効率を最大にする運転電圧 V_{opt} は、ほぼOCVと一致する。従って、 V_{opt} をOCVと区別することは意味を持たず、運転電圧は燃料電池作成コストの観点のみから設計される。

【0015】しかし、例えば、家庭用を念頭においた数kW級のシステムでは、熱出力（反応熱）と維持熱は同程度であり、維持熱が熱出力を上回る場合もあって、その場合には、 V_{opt} とOCVとは相異なり、 V_{opt} は有意な値となり、 V_{opt} を知ることは運転電圧の設計に於いて大きな意味を持つ。このような場合に、従来のシステム構成要素を運転温度に維持する為の熱を無視したシミュレーション技術によっては、 V_{opt} を決定することはできない、という問題が生じる。

【0016】本発明は、上記問題に鑑みてなされたものであり、数kW級の燃料電池システムの発電効率が最大となる時の運転電圧 V_{opt} を算出することが可能となるように、数kW級の燃料電池システムに対しても、運転電圧と発電効率との関係をシミュレートできる燃料電池シミュレータ、燃料電池のシミュレーション方法、燃料電池のシミュレーションプログラムおよびそのプログラムを記録した記録媒体を提供することを課題とする。

【0017】

【課題を解決するための手段】上記課題を解決するために、本発明においては、請求項1に記載のように、燃料電池システムの特性をシミュレートする燃料電池シミュレータに於いて、環境温度に対して前記燃料電池システムの各構成要素を運転温度に維持する為に必要な単位時間あたりの熱量の総和 $H_{k.e.p.}$ と、前記各構成要素

での単位時間あたりの化学反応熱の総和 $H_{r.e.a.c}$ とを算出し、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ よりも大きければ下記式 (1) を用い、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ を超えなければ下記式 (2) を用いて、前

$$\eta(V) = w / (nE + H_{k.e.e.p} - H_{r.e.a.c}) \quad (1)$$

$$\eta(V) = w / (nE) \quad (2)$$

但し、 w は前記燃料電池システムの電気出力であり、 n は前記燃料電池システムに単位時間あたり投入する燃料のモル数であり、 E は前記燃料 1 モルの燃焼によって放出されるエネルギーである。

【0019】また、本発明においては、請求項 2 に記載のように、請求項 1 に記載の燃料電池シミュレータに於いて、下記式 (3) に基づいて前記発電効率 $\eta(V)$ を最大にする運転電圧 V_{opt} を算出する演算手段を有することを特徴とする燃料電池シミュレータを構成する。

【0020】

【数 4】

【数 4】

$$\left. \frac{\partial \eta(V)}{\partial V} \right|_{V=V_{opt}} = 0 \quad (3)$$

$$\eta(V) = w / (nE + H_{k.e.e.p} - H_{r.e.a.c}) \quad (1)$$

$$\eta(V) = w / (nE) \quad (2)$$

但し、 w は前記燃料電池システムの電気出力であり、 n は前記燃料電池システムに単位時間あたり投入する燃料のモル数であり、 E は前記燃料 1 モルの燃焼によって放出されるエネルギーである。

【0022】また、本発明においては、請求項 4 に記載のように、請求項 3 に記載の燃料電池のシミュレーション方法に於いて、下記式 (3) に基づいて前記発電効率 $\eta(V)$ を最大にする運転電圧 V_{opt} を算出することを特徴とする燃料電池のシミュレーション方法を構成する。

【0023】

【数 5】

【数 5】

$$\left. \frac{\partial \eta(V)}{\partial V} \right|_{V=V_{opt}} = 0 \quad (3)$$

$$\eta(V) = w / (nE + H_{k.e.e.p} - H_{r.e.a.c}) \quad (1)$$

$$\eta(V) = w / (nE) \quad (2)$$

但し、 w は前記燃料電池システムの電気出力であり、 n は前記燃料電池システムに単位時間あたり投入する燃料のモル数であり、 E は前記燃料 1 モルの燃焼によって放出されるエネルギーである。

【0025】また、本発明においては、請求項 6 に記載のように、燃料電池のシミュレーションプログラムであって、コンピュータに、環境温度に対して前記燃料電池

記燃料電池システムの運転電圧 V における発電効率 $\eta(V)$ を算出する演算手段を有することを特徴とする燃料電池シミュレータを構成する。

【0018】

また、本発明においては、請求項 3 に記載のように、燃料電池システムの特性をシミュレートする燃料電池のシミュレーション方法に於いて、環境温度に対して前記燃料電池システムの各構成要素を運転温度に維持する為に必要な単位時間あたりの熱量の総和 $H_{k.e.e.p}$ と、前記各構成要素での単位時間あたりの化学反応熱の総和 $H_{r.e.a.c}$ とを算出し、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ よりも大きければ下記式 (1) を用い、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ を超えなければ下記式 (2) を用いて、前記燃料電池システムの運転電圧 V における発電効率 $\eta(V)$ を算出することを特徴とする燃料電池のシミュレーション方法を構成する。

【0021】

また、本発明においては、請求項 5 に記載のように、燃料電池のシミュレーションプログラムであって、コンピュータに、環境温度に対して前記燃料電池システムの各構成要素を運転温度に維持する為に必要な単位時間あたりの熱量の総和 $H_{k.e.e.p}$ と、前記各構成要素での単位時間あたりの化学反応熱の総和 $H_{r.e.a.c}$ とを算出する演算手段を実行させ、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ よりも大きければ下記式 (1) を用い、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ を超えなければ下記式 (2) を用いて、前記燃料電池システムの運転電圧 V における発電効率 $\eta(V)$ を算出する演算手段を実行させるための燃料電池のシミュレーションプログラムを構成する。

【0024】

システムの各構成要素を運転温度に維持する為に必要な単位時間あたりの熱量の総和 $H_{k.e.e.p}$ と、前記各構成要素での単位時間あたりの化学反応熱の総和 $H_{r.e.a.c}$ とを算出する演算手段を実行させ、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ よりも大きければ下記式 (1) を用い、前記 $H_{k.e.e.p}$ が前記 $H_{r.e.a.c}$ を超えなければ下記式 (2) を用いて、前記燃料電池システ

ムの運転電圧Vにおける発電効率 $\eta(V)$ を算出する演算手順を実行させ、下記式(3)に基づいて前記発電効率 $\eta(V)$ を最大にする運転電圧 V_{opt} を算出する演

$$\eta(V) = w / (nE + H_{k.e.p} - H_{r.e.a.c}) \quad (1)$$

$$\eta(V) = w / (nE) \quad (2)$$

但し、wは前記燃料電池システムの電気出力であり、nは前記燃料電池システムに単位時間あたり投入する燃料のモル数であり、Eは前記燃料1モルの燃焼によって放出されるエネルギーである。

【0027】

【数6】

【数6】

$$\left. \frac{\partial \eta(V)}{\partial V} \right|_{V_{opt}} = 0 \quad (3)$$

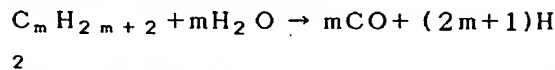
また、本発明においては、請求項7に記載のように、請求項5に記載の燃料電池のシミュレーションプログラムを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体を構成する。

【0028】また、本発明においては、請求項8に記載のように、請求項6に記載の燃料電池のシミュレーションプログラムを記録したコンピュータ読み取り可能な記録媒体を構成する。

【0029】

【発明の実施の形態】以下、本発明の実施の形態について詳細に説明する。

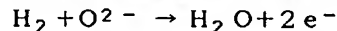
【0030】図1は、燃料電池システムの一例である固体酸化物形燃料電池(SOFC)システムの構成を示す図である。図において、4はシステムに投入される炭化水素系ガス1の水蒸気改質反応、



を行う外部改質器であり、8はセルスタック22内で水蒸気改質を行う為の触媒が充填された内部改質器であり、9は一酸化炭素の電解質を介した酸化反応、



及び水素の電解質を介した酸化反応、



を行う固体酸化物形燃料電池であり、10はセルスタック22内で電池反応を行った後の混合ガス(矢印の表示なし)に含まれる水素及び一酸化炭素の燃焼反応、 $CO + 0.5 O_2 \rightarrow CO_2$ 、及び、 $H_2 + 0.5 O_2 \rightarrow H_2 O$

を行う燃焼器であり、6は燃焼器10の排ガスの一部1

$$\eta(V) = w / (nE + H_{k.e.p} - H_{r.e.a.c}) \quad (1)$$

と定義する。

【0035】つぎに、 $H_{k.e.p} \leq H_{r.e.a.c}$ とな

$$\eta(V) = w / (nE)$$

と定義する。

【0036】上記の定義(式(1)または(2))に従

算手順を実行させるための燃料電池のシミュレーションプログラムを構成する。

【0026】

1と外部改質器4から流出する混合ガス5との熱交換を行う熱交換器であり、2は熱交換器6から流出する排ガス13と炭化水素系ガス1との熱交換を行う熱交換器であり、18は固体酸化物形燃料電池9に流入する空気19と燃焼器10の排ガスからその一部11を除いた残りの排ガス12との熱交換を行う熱交換器であり、16は熱交換器18から流出する排ガス20と空気15との熱交換を行う熱交換器である。

【0031】炭化水素系ガス1は、熱交換器2によって加熱され、水蒸気との混合ガス3となって外部改質器4に流入して改質反応を起こした後、混合ガス5となって熱交換器6を通り、熱交換後の混合ガス7は内部改質器8に流入して改質反応を起こした後、固体酸化物形燃料電池9に流入する。空気15は熱交換器16で外部改質器4の温度まで加熱され、高温の空気17となり、熱交換器18を経由して固体酸化物形燃料電池9に流入する。固体酸化物形燃料電池9に於ける反応後の混合ガスは燃焼器10に流入して燃焼反応を起こした後、熱交換器6及び2あるいは熱交換器18及び16を経由して、排ガス14あるいは21として排出される。

【0032】本発明に係る燃料電池シミュレータおよび燃料電池のシミュレーション方法においては、従来技術と異なり、燃料電池システムの構成要素を運転温度に維持する為の熱を無視せずに、運転電圧Vにおける発電効率 $\eta(V)$ を算出する。

【0033】燃料電池システムのAC出力をw、システムに単位時間あたり投入する燃料のモル数をn、燃料1モルあたりの燃焼によって放出されるエネルギーをE、環境温度に対して燃料電池システムの各構成要素を運転温度に維持する為に必要な単位時間あたりの熱量の総和を $H_{k.e.p}$ 、前記各構成要素での単位時間あたりの化学反応熱の総和を $H_{r.e.a.c}$ として、以下の通り、燃料電池システムの運転電圧Vにおける発電効率 $\eta(V)$ を定義する。

【0034】まず、 $H_{k.e.p} > H_{r.e.a.c}$ となる場合は、前記各構成要素を運転温度に維持する為に外部から $H_{k.e.p} - H_{r.e.a.c}$ の熱を、入力エネルギーとして、加える必要があるため、発電効率 $\eta(V)$ は、

$$\eta(V) = w / (nE + H_{k.e.p} - H_{r.e.a.c}) \quad (1)$$

る場合は、外部から熱を加える必要が無いので、発電効率 $\eta(V)$ は、

$$(2)$$

って発電効率 $\eta(V)$ を求めるためには、 $H_{k.e.p}$ 及び $H_{r.e.a.c}$ の値を知らなければならない。

【0037】図1に示した燃料電池システムを例として、以下に、具体的に n 、 $H_{k.e.p.}$ 及び $H_{r.e.c.}$ を決定する方法を、数式を用いて解説する。

【0038】燃料(炭化水素系ガス1)は、S/C比が2.00となるように水を添加したメタン(CH_4)($E=800\text{ kJ/モル}$ 、LHV)とする。この燃料は、ほぼ100%外部改質器4及び内部改質器8で水蒸気改質されて水素(H_2)と一酸化炭素(CO)となる。その場合の反応は、
 $CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$
 で表される。

【0039】COは、さらに、水性シフト反応、
 $CO + H_2O \rightarrow H_2 + CO_2$
 するが、この反応で1モルのCOから1モルの H_2 が生成し、水性シフト反応の前と後とで、 H_2 とCOのモル数の総和は変わらないので、固体酸化物形燃料電池9には、単位時間あたり合計で4nモルの H_2 とCOが供給される。1モルのCOの電解質を介した酸化反応及び1モルの H_2 の電解質を介した酸化反応からは、共に2モルの電子が取り出せるので、ファラデー定数をF、固体酸化物形燃料電池9での H_2 とCOの電池反応させる割合を共にrとすれば、固体酸化物形燃料電池

$$n = w / (8FrV(1 - \lambda_{A.D})(1 - \lambda_{a.u.x})) \quad (5)$$

として求める。

【0042】次いで、 $H_{k.e.p.}$ を決定する。

【0043】 $H_{k.e.p.}$ は、今回は各要素から断熱材を介して外部に放出される熱量で代表した。その決定方法であるが、まず、各システム構成要素における化学反応量や温度変化から各システム構成要素の体積を求める。次いで、各システム構成要素の体積から、外部改質器4、固体酸化物形燃料電池9、内部改質器8及び燃焼器10が一まとまりとなったモジュール及び熱交換器の表面積を求め、前記モジュール及び熱交換器2、6、16、18から断熱材を介して外部に放出される熱量を求め、最後にそれらを全て足し合わせて $H_{k.e.p.}$ とする。

【0044】前記モジュールとしては図2のような構成のものを想定する。

【0045】モジュールは、図2の(b)外觀図に示したように、燃焼器35と円筒セル部分36とからなり、円筒セル部分36は、図2の(a)円筒セル部分断面図

【数7】

$$K = \exp \left[\left(\frac{5090}{T} \right) - 0.911 \ln T + 2.24 \frac{T}{1000} - 3.42 \frac{T^2}{1000000} - 0.272 \right]$$

によって算出する。ここで、Tは絶対温度である。外部改質器32の体積 $V_{o.l.-R.e.}$ は、外部改質器32(これは燃料システムの燃料流入部分外部である)に単

$V_{o.l.-R.e.}$

9から取り出せる電流Iは、

$$I = 8nrF$$

で表される。時間の単位を秒、Fの単位をクーロンとすれば、Iの単位はアンペアとなる。これより、固体酸化物形燃料電池9の運転電圧をVとすれば、固体酸化物形燃料電池9の直流出力 w_d は、

$$w_d = IV = 8nrFV$$

で表される。I、Vの単位をそれぞれボルト、アンペアとすれば、 w_d の単位はワットとなる。

【0040】直流電力を交流電力に変換する際のロスの、直流電力に対する割合を $\lambda_{A.D}$ 、ガスを流動させるのに必要なエネルギーの、交流に変換された電力に対する割合を $\lambda_{a.u.x}$ とすると、燃料電池の交流出力wは、

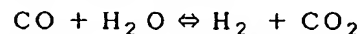
$$w = 8(1 - \lambda_{A.D})(1 - \lambda_{a.u.x})nrFV$$

で表される。但し、上記において、システムに供給された燃料(炭化水素系ガス1、この場合は CH_4)は全て内部改質器8及び外部改質器4で水蒸気改質されたとしている。

【0041】この場合に、単位時間あたり投入されるメタンのモル数nを、上記最後の式から、

に示したように、外部改質器32、円筒形の固体酸化物形燃料電池33及び内部改質器34を断熱材31で囲んで構成されている。

【0046】最初に、外部改質器32の体積を求める。外部改質器32では流入した CH_4 の一部(CH_4 転化率を $r_{o.-R.e.}$ とする)が水蒸気改質、
 $CH_4 + H_2O \rightarrow 3H_2 + CO$
 され、水性シフト反応、



が平衡に達しているとする。平衡の計算は各成分の分圧が平衡式、

$$K = (P_{H_2} P_{CO_2}) / (P_{CO} P_{H_2O})$$

を満足するとして計算する。ここで、Kは水性シフト反応の平衡定数であり、その値はサッカー(Thacker)の式、

【0047】

【数7】

位時間あたり流入する CH_4 のモル数をn、1モル/sの CH_4 を改質するのに必要な体積を $k_{R.e.}$ (=1.81 m^3 s/モル)として、

$$= r_o - r_e n k_{R_e}$$

$$= r_o - r_e w k_{R_e} / (8 F r V (1 - \lambda_{A_D}) (1 - \lambda_{a_{u_x}})) \quad (6)$$

によって求める。

【0048】次いで、内部改質器34の体積を求める。内部改質器34においては、流入した CH_4 は全て水蒸気改質され、水性シフト反応が平衡に達しているとする

$$Vol_{i-R_e}$$

$$= (1 - r_o - r_e) n k_{R_e}$$

$$= (1 - r_o - r_e) w k_{R_e} / (8 F r V (1 - \lambda_{A_C}) (1 - \lambda_{a_{u_x}})) \quad (7)$$

によって求める。

【0049】次いで、固体酸化物形燃料電池33の体積を求める。固体酸化物形燃料電池33のI-V特性は、ジーメンス ウェスチングハウス (Siemens Westinghouse) の報告を参考にして、OCV = V_{OCV} を0.837ボルトとし、単位面積あたりのコンダクタンス $1/R_N$ を $1/0.900 \Omega^{-1} \cdot cm^{-2}$ とし、電流密度を I_N [単位は例えばアンペア/ cm^2] として、 $V = V_{OCV} - I_N R_N$ と仮定する。

$$Vol_S = 1.25 dw / ((1 - \lambda_{A_D}) (1 - \lambda_{a_{u_x}}) \pi P) \quad (8)$$

によって求める。これは、断面の直径がdのチューブ (長さL) を多数並べる為には、各チューブが一辺の長さdの正方形断面をもつ直方体 (長さL) の体積を必要とすると仮定したものである。

【0051】次いで、燃焼器35の体積を求める。固体酸化物形燃料電池33において未反応であった H_2 、COの全てを、燃焼器35において、反応、 $H_2 + 0.5 O_2 \rightarrow H_2 O$ 、

$$Vol_{C.O.m}$$

$$= 4 (1 - r) n k_{C.O.m}$$

$$= 4 (1 - r) w k_{C.O.m} / (8 F r V (1 - \lambda_{A_D}) (1 - \lambda_{a_{u_x}})) \quad (9)$$

によって求める。

【0053】最後に、熱交換器2、6、16、18それぞれの体積を求める。

【0054】まず、低温側の入口温度、出口温度、高温側の入口温度、出口温度を、それぞれ、 $T_{L,i}$ 、 $T_{L,o}$ 、 $T_{H,i}$ 、 $T_{H,o}$ として、エネルギーバ

【数8】

$$T_{L,o} \sum_{L,i} n_A C_A - T_{L,i} \sum_{L,i} n_A C_A = T_{H,i} \sum_{H,i} n_A C_A - T_{H,o} \sum_{H,i} n_A C_A$$

を用いて、 $T_{L,i}$ 、 $T_{L,o}$ 、 $T_{H,i}$ から $T_{H,o}$ を求める。ここで、 n_A 、 C_A は、それぞれ、成分Aのモル流量 [単位は例えばモル/s]、モル比熱 [単位は例えばJ/(モル・K)] である。また、総和記号 Σ の下にL、i、L、o、H、i、H、oは、それぞれ、低温側の流入ガス、流出ガス、高温側の流入ガス、流出ガスの成分についての総和を表す。

【0056】次いで、対向流を仮定して伝熱面積を求める。

る。内部改質器34の体積 Vol_{i-R_e} は、内部改質装置34に単位時間あたり流入する CH_4 のモル数 $(1 - r_o - r_e) n$ から、

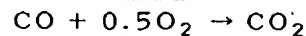
【0050】出力密度P [単位は例えばワット/ cm^2] は、 $P = V (V_{OCV} - V) / R_N$ となるので、固体酸化物形燃料電池33のセル面積 A_C は、有効セル面積率を80.0%として、 $A_C = 1.25 w / (P (1 - \lambda_{A_D}) (1 - \lambda_{a_{u_x}}))$ となる。ここから、直径dの円筒型固体酸化物形燃料電池33を想定し、固体酸化物形燃料電池33の体積 Vol_S を、

$$P = V (V_{OCV} - V) / R_N$$

となるので、固体酸化物形燃料電池33のセル面積 A_C は、有効セル面積率を80.0%として、

$$A_C = 1.25 w / (P (1 - \lambda_{A_D}) (1 - \lambda_{a_{u_x}}))$$

となる。ここから、直径dの円筒型固体酸化物形燃料電池33を想定し、固体酸化物形燃料電池33の体積 Vol_S を、



によって燃焼させるとした。

【0052】温度は、固体酸化物形燃料電池33の排ガスを300K上昇させるとした。燃焼器35の体積 $Vol_{C.O.m}$ は、燃焼器35に単位時間あたり流入する H_2 とCOのモル数の和 $4(1 - r) n$ から、 H_2 とCOの混合気体1モルを単位時間で燃焼させるのに必要な体積 $k_{C.O.m}$ ($= 1.93 m^3 s / \text{モル}$) を用いて、

$T_{L,o}$ 、 $T_{H,i}$ 、 $T_{H,o}$ として、エネルギーバ

【0055】

【数8】

【0057】無次元温度 ϕ_L 、 ϕ_H を、

$$\phi_L = (T_{L,o} - T_{L,i}) / (T_{H,i} - T_{L,i})$$

$$\phi_H = (T_{H,i} - T_{H,o}) / (T_{H,i} - T_{L,i})$$

とし、無次元平均温度差 ψ を、

【0058】

【数9】

【数9】

$$\psi = \frac{\phi_x}{\theta}, \text{ここに } \theta = \frac{\phi_h - \phi_c}{\ln \frac{1 - \phi_h}{1 - \phi_c}}$$

として、伝熱面積 S_h を

【0059】

【数10】

【数10】

$$S_h = \frac{\sum \dot{Q}_i C_i}{K}$$

$$Vol_h = S_h d_h / \pi$$

によって求める。これは、断面の直径が d_h のチューブ（長さ L ）を多数並べる為には、各チューブが一辺の長さ d_h の正方形断面をもつ直方体（長さ L ）の体積を必要とすると仮定したものである。

【0060】これから、固体酸化物形燃料電池33、内部改質器34、外部改質器32及び燃焼器35が一まとまりとなったモジュール及び熱交換器2、6、16、18から放出される熱量、すなわち燃料電池システムの各

$$S_{c_{e11}} = 5(d_i + (Vol_{o-re} + Vol_s + Vol_{i-re})^{1/3})^2 \quad (11)$$

によって計算する。ここで、 d_i は断熱材31の厚さである。

$$S_{c_{om}} = 5(d_i + (Vol_{c_{om}})^{1/3})^2 \quad (12)$$

によって求める。

【0062】熱交換器2、6、16、18それぞれにつ

$$S_h = 6(d_i + (Vol_h)^{1/3})^2 \quad (13)$$

とする。各要素から放出される熱量、すなわち各要素の温度を維持するのに、その要素に対して必要な単位時間あたりの熱量 Q_{keep} は、目標温度を T_{target} と

$$Q_{keep} = \rho(T_{target} - T_{atmo})S/d_i \quad (14)$$

と計算される。

【0063】円筒セル部分36の T_{target} は、外部改質器32の温度 T_{o-re} 、燃焼器35や熱交換器2、6、16、18のように温度が変化する要素の T_{target} は、その入口と出口の平均温度とする。

【0064】各要素について算出された Q_{keep} を足し合わせて H_{keep} を求める。このようにして求められた H_{keep} は環境温度 T_{atmo} に依存して変化し、 T_{atmo} が高ければ H_{keep} は低くなる。

【0065】最後に、各構成要素での単位時間あたりの

によって求める。ここで、 K は熱伝達係数〔単位は例えば $W/(m^2 \cdot K)$ 〕であり、セルチューブ型の熱交換器を想定して $30.0 W/(m^2 \cdot K)$ とした。 S_h から、直径 d_h ($=25.4 mm$) のチューブを仮定して熱交換器の体積 Vol_h を、

(10)

構成要素を運転温度に維持する為に必要な単位時間あたりの熱量 H_{keep} を求める。モジュールでは燃焼器の温度が高いため、図2の外観図のように、固体酸化物形燃料電池33、外部改質器34及び内部改質器34は一まとめ（円筒セル部分36）として扱い、その上部に燃焼器35があると想定した。円筒セル部分36の表面積 $S_{c_{e11}}$ は、体積から立方体を仮定して1面の面積を求め、6面のうち5面が環境に面しているとして、

【0061】燃焼器35の部分の表面積 $S_{c_{om}}$ も同様に、

いての表面積 S_h は、

し、環境温度すなわち燃料電池システムを囲む周囲の温度を T_{atmo} とし、断熱材の熱伝導率を ρ とし、断熱材の厚さを d_i とし、表面積を S とし、

化学反応熱の総和 H_{rea} を求める。反応熱は外部改質器32、燃焼器35、固体酸化物形燃料電池33及び内部改質器34の化学反応熱の和である。

【0066】外部改質器32の単位時間あたりの反応熱 Q_{o-re} （発熱を正に取る）は、水蒸気改質で発生したCOが水性シフト反応する割合を r_{o-rs} （これは平衡計算から決定する）とし、改質反応のモルあたりのエンタルピー変化を ΔH_{re} とし、水性シフト反応のモルあたりのエンタルピー変化を ΔH_{sh} とし、

【0067】

【数11】

【数11】

$$Q_{o-re} = -r_{o-re} n (\Delta H_{H_2} + r_{o-re} \Delta H_{H_2O})$$

$$= - \frac{r_{o-re} w (\Delta H_{H_2} + r_{o-re} \Delta H_{H_2O})}{8 F r V (1-\lambda_{AD}) (1-\lambda_{aux})}$$

によって計算する。

【0068】内部改質器34の単位時間あたりの反応熱

 Q_{i-re} は、 r_{i-re} を水蒸気改質で発生したC

【数12】

$$Q_{i-re} = -(1-r_{o-re}) n (\Delta H_{H_2} + r_{i-re} \Delta H_{H_2O})$$

$$= - \frac{(1-r_{o-re}) w (\Delta H_{H_2} + r_{i-re} \Delta H_{H_2O})}{8 F r V (1-\lambda_{AD}) (1-\lambda_{aux})}$$

によって計算する。

【0070】固体酸化物形燃料電池33の単位時間あたりの反応熱 Q_S は、 H_2 、COの酸化反応の単位時間あたりの反応熱から単位時間あたりの電気仕事を引いたものである。 H_2 の酸化反応のモルあたりのエンタルピー変化を ΔH_{H_2} 、COの酸化反応のモルあたりのエンタルピー変化を ΔH_{CO} とし、固体酸化物形燃料電池33に単位時間あたり流入する H_2 のモル数 $n(3+r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re} + (1-r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re}) r_{i-re})$ 及びCOのモル数 $n(1-r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re} - (1-r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re}) r_{i-re})$ から、 Q_S を、

【数13】

$$Q_S =$$

$$- \frac{r w (3 + r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re} + (1 - r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re}) r_{i-re}) \Delta H_{H_2}}{8 F r V (1 - \lambda_{AD}) (1 - \lambda_{aux})}$$

$$- \frac{r w (1 - r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re} - (1 - r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re}) r_{i-re}) \Delta H_{CO}}{8 F r V (1 - \lambda_{AD}) (1 - \lambda_{aux})}$$

$$- \frac{w}{(1 - \lambda_{AD}) (1 - \lambda_{aux})}$$

によって求める。

【0072】燃焼器35の単位時間あたりの反応熱 Q_{com}

com は、上昇する温度を $\Delta T (=300K)$ 、単位時間あたり流出する混合気体のモル数、モル比熱を、そ

【数14】

$$Q_{com} =$$

$$- \frac{(1-r) w (3 + r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re} + (1 - r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re}) r_{i-re}) \Delta H_{H_2}}{8 F r V (1 - \lambda_{AD}) (1 - \lambda_{aux})}$$

$$- \frac{(1-r) w (1 - r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re} - (1 - r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re}) r_{i-re}) \Delta H_{CO}}{8 F r V (1 - \lambda_{AD}) (1 - \lambda_{aux})}$$

$$- n_{com} \Delta T C_{com}$$

によって求める。

【0074】外部改質器32、内部改質器34、固体酸化物形燃料電池33及び燃焼器35の単位時間あたりの化学反応熱 Q_{o-re} 、 Q_{i-re} 、 Q_S 、 Q_{com} を全て足し合わせて、単位時間あたりの反応熱 H_{reac} を求める。

【0075】以上の手順に従い、 $r=0.800$ 、 $V=0.650$ ボルト、 $\lambda_{AD}=0.0700$ 、 $\lambda_{aux}=0.0700$ 、 $r_{o-re}=0.200$ 、 $d=0.022$

Oが水性シフト反応する割合であるとして、

【0069】

【数12】

池33に単位時間あたり流入する H_2 のモル数 $n(3+r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re} + (1-r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re}) r_{i-re})$ 及びCOのモル数 $n(1-r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re} - (1-r_{o-re} r_{o-re} r_{i-re}) r_{i-re})$ から、 Q_S を、

【0071】

【数13】

それぞれ、 n_{com} 、 C_{com} として、

【0073】

【数14】

$0m$ 、 $d_h=0.0254m$ 、 $d_i=0.100m$ 、 $\rho=0.300W/(m/K)$ 、 $T_{atm}=298K$ 、 $T_{o-re}=1070K$ 、固体酸化物形燃料電池33及び内部改質器34の温度 $=1270K$ とし、 w を変化させて発電効率 $\eta(V)$ のシミュレーションを行う。

【0076】図3に発電量 w と発電効率 $\eta(V)$ の関係を示す。破線は従来の特性予測を用いた値であり、実線は本発明のシミュレータによる計算値である。

【0077】従来の特性予測では電気出力に依らず一定

の発電効率であった。これに対し、本発明のシミュレータの計算では、システムの発電効率は、ある出力以下では、電気出力が小さくなるほど低くなった。この電気出力のシステムは、化学反応熱がシステム構成要素を運転温度に維持する為の熱と等しくなるシステムである。図中の黒丸(●)はジーメンス ウェスチングハウス (Siemens Westinghouse) 社製の100kW級、200kW級の固体酸化物形燃料電池システムの発電効率であり、黒三角(▲)はズルツェル ヘクシス (Sulzer Hexis) 社製の1kW級、2kW級の固体酸化物形燃料電池システムの発電効率である。ジーメンス ウェスチングハウス (Siemens Westinghouse) 社製のSOFCシステムは円筒型セル及び通常の断熱材を用いたシステムであり、今回の設定に近い。そのため計算値と実測値はよく一致している。ある電気出力以上では発電効率が殆ど変化しないことも表現できている。若干のズレは燃料種や運転電圧の違いによる。ズルツェルヘクシス (Sulzer Hexis) 社製のSOFCシステムは平板型セル及び真空断熱を用いるなど、今回の計算と設定が異なるので、計算値と実測値はあまり一致しない。しかし、小電気出力のシステムにおける発電効率の発電規模に対する影響の傾向は捉えられている。これから、本発明のシミュレータでは、従来行えなかったSOFCシステムの評価ができていことが確認できる。

【0078】続いて、 $r=0.800$ 、 $w=10000$ W (10.0kW)、 $\lambda_{AD}=0.0700$ 、 $\lambda_{aux}=0.0700$ 、 $r_{ore}=0.200$ 、 $d=0.0220$ m、 $d_h=0.0254$ m、 $d_i=0.100$ m、 $\rho=0.300$ W/m/K、 $T_{atm}=298$ K、 $T_{ore}=1070$ K、固体酸化物形燃料電池33及び内部改質器34の温度 $=1270$ Kとし、 V を変化させて発電効率 $\eta(V)$ のシミュレーションを行う。

【0079】図4に、電圧 V と発電効率 $\eta(V)$ の関係を示す。破線は従来の特性予測を用いた値であり、実線は本発明のシミュレータによる計算値である。

【0080】従来の特性予測では、電圧を上昇させればさせるほど発電効率が高いという傾向になった。しかし、10kW程度のシステムに於いてシステム構成要素を運転温度に維持する為の熱を無視してよい保証は無く、この計算結果は信頼できない。これに対し、本発明のシミュレータによるシミュレーションでは、発電効率はある運転電圧で極値を持つこととなった。これは、実際の固体酸化物型燃料電池システムの状況とも整合しており、本発明のシミュレータでは従来行えなかった評価ができていことが確認できる。この極値において、発電効率は最大となるわけだが、それを実現する運転電圧 V_{opt} は、

【0081】

【数15】

【数15】

$$\frac{\partial \eta(V)}{\partial V} \bigg|_{V=V_{opt}} = 0 \quad (3)$$

に基づいて算出することができる。上記式(3)は、 $\eta(V)$ の V に関する偏微分係数の $V=V_{opt}$ における値が0であることを表している。実際に、上記式(3)によって V_{opt} を求めるには、条件： $V=V_{opt}$ を度外視して、上記式(3)の左辺における偏微分の値を算出し、その値が0となるとき V を V_{opt} とすればよい。

【0082】上記の設定では、 V_{opt} は、上記式(3)に基づいて $V_{opt}=0.71$ ボルトと決定される。

【0083】以上に説明したように、本発明に係る燃料電池シミュレータおよび燃料電池のシミュレーション方法は、 H_{keep} と H_{reac} とを算出し、上記式(1)または式(2)を用いて、燃料電池システムの運転電圧 V における発電効率 $\eta(V)$ を算出し、従来行えなかった小電気出力のシステムにおける発電効率の評価を可能とする。

【0084】さらに、本発明に係る燃料電池シミュレータおよび燃料電池のシミュレーション方法は、上記式(3)に基づいて、燃料電池システムの発電効率 $\eta(V)$ を最大とする運転電圧 V_{opt} を算出し、従来行えなかった小電気出力のシステムにおける発電効率最大の場合の運転電圧 V_{opt} の算出を可能とする。

【0085】このように、本発明に係る燃料電池シミュレータおよび燃料電池のシミュレーション方法の実施により、任意の電気出力、運転電圧、電池反応させる燃料の割合における燃料電池システムの特性の評価を行うことができる。また、それに基づいて最大の効率を実現するシステムの設計を行うことができる。

【0086】燃料電池システムのAC出力 w 、運転電圧 V および電池反応の割合 r を設定し、上記のシミュレーション方法によって、該燃料電池システムの発電効率 $\eta(V)$ を算出する演算手段を有するシミュレータが請求項1に記載の燃料電池シミュレータの実施の形態例となり、該シミュレータによって実行されるシミュレーション方法が請求項3に記載の燃料電池のシミュレーション方法の実施の形態例となる。

【0087】さらに、燃料電池システムのAC出力 w および電池反応の割合 r を設定し、運転電圧 V の値を変え、各値に対する発電効率 $\eta(V)$ の値を上記のシミュレーション方法によって求め、それによって得られる、発電効率 $\eta(V)$ と運転電圧 V との関係から、上記式(3)に基づいて、発電効率 $\eta(V)$ を最大とする運転電圧 V_{opt} を算出する演算手段を有するシミュレータが請求項2に記載の燃料電池シミュレータの実施の形態例となり、該シミュレータによって実行されるシミュレーション方法が請求項4に記載の燃料電池のシミュレーション方法の実施の形態例となる。

レーション方法が請求項4に記載の燃料電池のシミュレーション方法の実施の形態例となる。

【0088】上記の燃料電池のシミュレーション方法のフローチャート（流れ図）を図5に示す。

【0089】図5に示したように、このシミュレーション方法においては、ステップS1で、燃料電池システムのAC出力 w 、運転電圧 V および電池反応の割合 r を入力（Input）し、ステップS2で、上記式（5）を用いて、燃料電池システムに単位時間あたり投入する燃料のモル数 n を求め、ステップS3で、内部改質器34の体積 V_{ol_i-R} 、外部改質器32の体積 V_{ol_o-R} 、固体酸化物形燃料電池33の体積 V_{ol_S} 、燃焼器35の体積 V_{ol_C} および熱交換器2、6、18個別の体積 V_{ol_h} を、それぞれ、上記式（7）、（6）、（8）、（9）および（10）を用いて求め、ステップS4で、円筒セル部分36の表面積 S_{ce_11} 、燃焼器35の部分の表面積 S_{c_m} および熱交換器2、6、16、18個別の表面積 S_h を、それぞれ、上記式（11）、（12）および（13）を用いて求め、ステップS5で、表面積 S_{ce_11} 、 S_{c_m} および S_h のそれぞれを通して放出される熱量 $Q_{k_e_p}$ を、上記式（14）を用いて求め、ステップS6で、ステップS5で求めた $Q_{k_e_p}$ を加え合わせて、燃料電池システムの各構成要素を運転温度に維持する為に必要な単位時間あたりの熱量の総和 $H_{k_e_p}$ を求める。ステップS3～S6とは独立して、ステップS7で、内部改質器34の単位時間あたりの反応熱 Q_{i-R} 、外部改質器32の単位時間あたりの反応熱 Q_{o-R} 、固体酸化物形燃料電池33の単位時間あたりの反応熱 Q_S および燃焼器35の単位時間あたりの反応熱 Q_{c_m} を、それぞれ、〔数12〕、〔数11〕、〔数13〕および〔数14〕を用いて求め、ステップS8で、ステップS7で求めた反応熱を加え合わせて、各構成要素での単位時間あたりの化学反応熱の総和 $H_{r_e_a_c}$ を求める。

【0090】ステップS6およびステップS8が完了した後に、ステップS9で、 $H_{k_e_p}$ と $H_{r_e_a_c}$ を比較し、ステップS10で、ステップS9の比較結果に基づいて、上記式（1）または（2）を用いて燃料電池システムの運転電圧 V における発電効率 $\eta(V)$ を求め、Output 1として出力する。さらに、発電効率 $\eta(V)$ を最大にする運転電圧 V_{p_t} を求める場合には、ステップS11に進んで、運転電圧 V の値を変えて、ステップS1～S10を1回以上繰り返し実行し、ステップS12で、その繰り返し実行によって求めた、発電効率 $\eta(V)$ と運転電圧 V との関係から、上記式（3）に基づ

いて、発電効率 $\eta(V)$ を最大にする運転電圧 V_{p_t} を求め、Output 2として出力する。

【0091】上記ステップS1からステップS10までの演算手順をコンピュータに実行させるためのプログラムは請求項5に記載の燃料電池のシミュレーションプログラムの実施の形態例となり、ステップS1からステップS12までの演算手順をコンピュータに実行させるためのプログラムは請求項6に記載の燃料電池のシミュレーションプログラムの実施の形態例となる。

【0092】また、上記ステップS1からステップS10までの演算手順をコンピュータに実行させるためのプログラムを記録した、磁気記録媒体、光記録媒体などのコンピュータ読み取り可能な記録媒体は請求項7に記載の記録媒体の実施の形態例となり、ステップS1からステップS12までの演算手順をコンピュータに実行させるためのプログラムを記録した、磁気記録媒体、光記録媒体などのコンピュータ読み取り可能な記録媒体は請求項8に記載の記録媒体の実施の形態例となる。

【0093】

【発明の効果】本発明の実施により、数kW級の燃料電池システムに対しても、運転電圧と発電効率との関係をシミュレートできる燃料電池シミュレータ、燃料電池のシミュレーション方法、燃料電池のシミュレーションプログラムおよびそのプログラムを記録した記録媒体を提供することができる。

【図面の簡単な説明】

【図1】固体酸化物形燃料電池システムを示す図である。

【図2】固体酸化物形燃料電池モジュールを示す図である。

【図3】電気出力と発電効率の関係を示す図である。

【図4】運転電圧と発電効率の関係を示す図である。

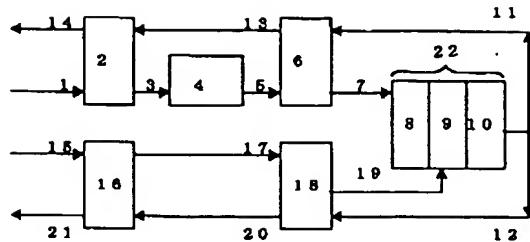
【図5】本発明に係る燃料電池のシミュレーション方法のフローチャート（流れ図）である。

【符号の説明】

1…炭化水素系ガス、2…熱交換器、3…熱交換器2から流出する混合ガス、4…外部改質器、5…外部改質器4から流出する混合ガス、6…熱交換器、7…熱交換器6から流出する混合ガス、8…内部改質器、9…固体酸化物形燃料電池、10…燃焼器、11、12…燃焼器10の排ガス、13、14…排ガス、15…空気、16…熱交換器、17…空気、18…熱交換器、19…空気、20、21…排ガス、22…セルスタック、31…断熱材、32…外部改質器、33…固体酸化物形燃料電池、34…内部改質器、35…燃焼器、36…円筒セル部分、S1～S12…シミュレーション方法のステップ。

【図1】

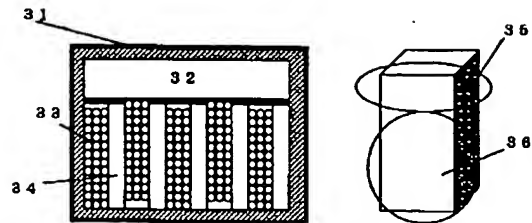
図1



- 1…炭化水素系ガス
 2…熱交換器
 3…熱交換器2から流出する混合ガス
 4…外部改質器
 5…外部改質器4から流出する混合ガス
 6…熱交換器
 7…熱交換器6から流出する混合ガス
 8…内部改質器
 9…固体酸化物形燃料電池
 10…燃焼器
 11、12…燃焼器10の排ガス
 13、14…排ガス
 15…空気
 16…熱交換器
 17…空気
 18…熱交換器
 19…空気
 20、21…排ガス
 22…セルスタック

【図2】

図2



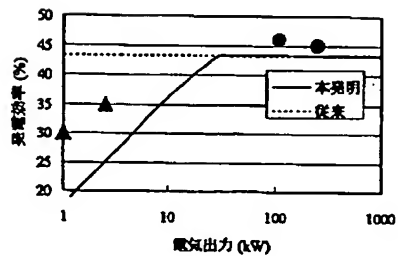
(a) 円筒セル部分断面図

(b) 外観図

- 31…断熱材
 32…外部改質器
 33…固体酸化物形燃料電池
 34…内部改質器
 35…燃焼器
 36…円筒セル部分

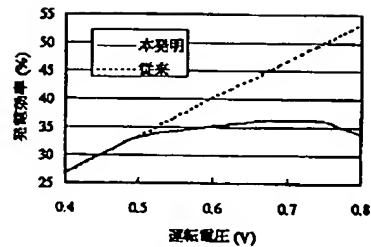
【図3】

図3



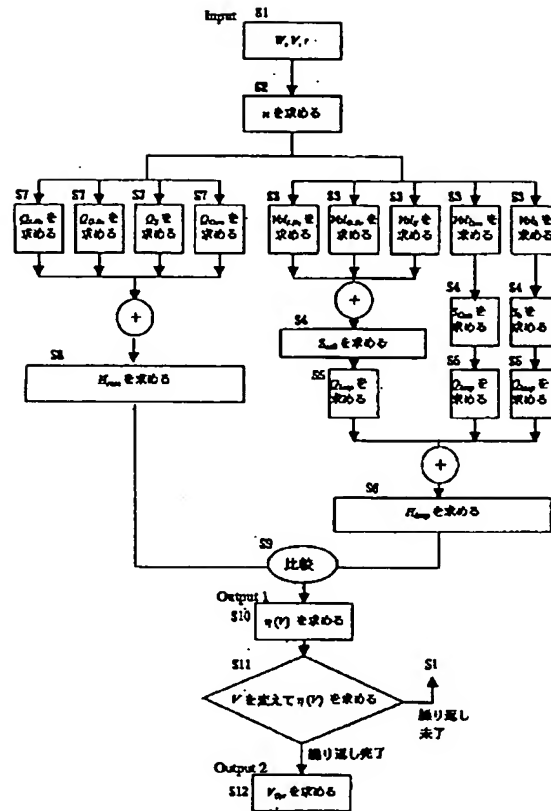
【図4】

図4



【図5】

図5



フロントページの続き

(72)発明者 竹内 章

東京都千代田区大手町二丁目3番1号 日

本電信電話株式会社内

(72)発明者 山下 暢彦

東京都千代田区大手町二丁目3番1号 日

本電信電話株式会社内

(72)発明者 遠藤 直恵

東京都千代田区大手町二丁目3番1号 日

本電信電話株式会社内

Fターム(参考) 5B056 BB72 BB91

5H026 AA06 HH06 HH10

5H027 AA06 BA01 BA02 KK25 KK46

KK52 KK54